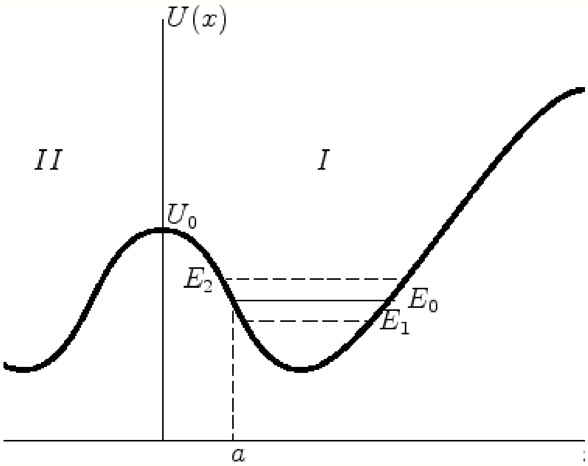
30: O poço duplo

A energia potencial $U(x)$ consiste de dois poços de potencial simétricos, separados por uma barreira. Na figura abaixo os poços são as regiões I e II, e a barreira tem altura U_0. Se a barreira fosse impenetrável, haveria níveis de energia relativos ao movimento da partícula em um ou outro dos dois poços, ou seja, duas famílias de níveis iguais, uma em cada poço. O fato de que o tunelamento através da barreira existe na mecânica quântica faz com que cada um dos níveis relativos ao movimento em um dos poços se separe em dois níveis próximos, correspondendo agora a estados da partícula em que ela está nos dois poços.



A determinação deste desdobramento de níveis é simples no caso em que se pode usar a aproximação quase clássica. É o que faremos agora. Uma solução aproximada da equação de Schrödinger para a energia potencial $U(x)$, desprezando a probabilidade de passagem pela barreira, pode ser construída com a função quase-clássica $\psi_0(x)$, que descreve o movimento com uma certa energia E_0 em um dos poços (digamos, o poço I), e que é exponencialmente decrescente em ambos os lados do poço I. A normalização aproximada desta função é

$$\int_0^{\infty} \psi_0^2 dx = 1 \tag{804}$$

Portanto, para ψ_0, temos satisfeita a equação de Schrödinger

$$\mathrm{d}^2\psi_0 \overline{dx^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))\psi_0(x)=0} \tag{805}$$

no seguinte sentido: para $x < 0$ a equação é aproximadamente satisfeita porque, tanto $\psi_0(x)$ quanto sua derivada segunda, nesta região, são aproximadamente nulas.

Estaremos usando, sem mencionar mais, os seguintes fatos: no caso de um sistema unidimensional confinado, isto é, impedido de alcançar o infinito, a função de onda pode ser tomada como real, e os níveis de energia não são degenerados.

O produto $\psi_0(x)\psi_0(-x)$, para $x > 0$, é desprezível. O potencial como um todo é simétrico. A equação de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(x)\right)\psi(x) = 0 \tag{806}$$

permanece válida quando se troca x por $-x$. Logo, se $\psi(x)$ é uma função de onda, $\psi(-x)$ também o é, para o mesmo valor de E. Como não há degenerescência, temos

$$\psi(-x) = e^{i\alpha}\psi(x) \ \text{ para } \alpha \text{ real} \tag{807}$$

Logo,

$$\psi(x) = e^{i\alpha}\psi(-x) = e^{2i\alpha}\psi(x) \tag{808}$$

e portanto $e^{2i\alpha} = 1$, de onde segue que $\alpha = n\pi$. Temos, em conseqüência,

$$\psi(-x) = \psi(x) \tag{809}$$

ou

$$\psi(-x) = -\psi(x) \tag{810}$$

As autofunções da energia deste sistema são, portanto, funções pares ou ímpares de x. Isto é uma consequência de que $U(-x) = U(x)$. As funções de onda corretas, na aproximação quase-clássica, são obtidas construíndo, a partir de ψ_0, as funções ψ_1, simétrica, e ψ_2, anti-simétrica:

$$\psi_1(x) \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_0(x) + \psi_0(-x)\right] \tag{811}$$

$$\psi_2(x) \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_0(x) - \psi_0(-x)\right] \tag{812}$$

Note que a função $\psi_0(x)$ não é autofunção do hamiltoniano com a energia potencial $U(x)$, simétrica: é a função de onda que teríamos de a barreira fosse impenetrável. Tanto que $\psi_0(-x)$ é desprezível, enquanto que $\psi_0(x)$ não o é. De novo, como os níveis não são degenerados, devemos ter energia s diferentes para ψ_1 e ψ_2. Sejam

$$\mathrm{d}^2\psi_1 \frac{}{dx^2+\frac{2m}{\hbar^2}(E_1-U(x))\psi_1(x)=0} \tag{813}$$

a equação de Schrödinger para ψ_1, e

$$\mathrm{d}^2\psi_2 \frac{}{dx^2+\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-U(x))\psi_2(x)=0} \tag{814}$$

aquela para ψ_2. Multiplicando (806) por ψ_1 e (814) por ψ_0 e subtraíndo, temos

$$\psi_1\psi_0'' - \psi_0\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E_0 - E_1\right)\psi_0\psi_1 = 0 \tag{815}$$

ou

$$\frac{d}{dx}\left(\psi_1\psi_0' - \psi_0\psi_1'\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E_1 - E_0\right)\psi_0\psi_1 \tag{816}$$

Integrando de 0 a ∞:

$$\int_0^\infty dx \frac{d}{dx}\left(\psi_1\psi_0' - \psi_0\psi_1'\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E_1 - E_0\right)\int_0^\infty dx \psi_0\psi_1 \tag{817}$$

$$\begin{aligned}\left(\psi_1\psi_0' - \psi_0\psi_1'\right)_0^\infty &= \left(E_1 - E_0\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^\infty dx\psi_0\left(\psi_0(x) + \psi\right. \\ &\approx \frac{2m}{\hbar^2}\left(E_1 - E_0\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^\infty \psi_0^2\end{aligned} \tag{818}$$

onde usamos o fato de $\psi_0(x)\psi_0(-x)$ ser muito pequeno. Lembrando que as funções que aparecem no primeiro membro se anulam no infinito, temos

$$\psi_0(0)\psi_1'(0) - \psi_1(0)\psi_0'(0) = \frac{m}{\sqrt{2}\hbar^2}\left(E_1 - E_0\right) \tag{819}$$

Seja $f(x)$ uma função par. Então,

$$f(-x) = f(x) \tag{820}$$

Consideremos agora a função $\frac{df(x)}{dx}$. Trocando x por $-x$,

$$\frac{df(x)}{dx} \rightarrow -\frac{df(-x)}{dx} \tag{821}$$

Logo,

$$\frac{df(-x)}{dx} = -\frac{df(x)}{dx} \tag{822}$$

ou seja, se f é par, f' é ímpar.

Voltando à (820),

$$\psi_1(0) = \frac{1}{[}\sqrt{2}\,[\psi_0(0) + \psi_0(0)] = \sqrt{2}\psi_0(0) \tag{823}$$

enquanto

$$\psi_1' = 0\ , \tag{824}$$

levando a

$$E_1 - E_0 = -\frac{\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi_0'(0) \tag{825}$$

Repetindo agora o cálculo com ψ_2 e ψ_0, obtemos, ao longo dos mesmos passos,

$$E_2 - E_0 = \frac{\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi_0'(0) \tag{826}$$

Subtraíndo, obtemos

$$E_2 - E_1 = \frac{2\hbar^2}{m}\psi_0\psi_0'(0) \tag{827}$$

Um cálculo mais refinado leva ao resultado

$$\mathrm{E}_2 - E_1 = Ce^{-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{a}|p|dx} \tag{828}$$

onde C é uma constante, e $-a$ e a são indicados na figura. A eq.(829) torna explícito o papel do tunelamento na separação dos níveis de energia.